

一种快速高效的逐线积分大气 吸收计算方法^{*}

张 华 石广玉

(中国科学院大气物理研究所, 北京 100029)

摘 要 本文发展了一种新的计算大气气体吸收系数以及冷却率的快速数值方法, 并对影响逐线积分精度和计算时间的各种因子进行了详细研究。以大气主要吸收气体 CO_2 15 μm 带的 $500\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 波段为例, 将新方法计算的吸收系数、大气透过率和冷却率结果与经典的逐线积分方法进行了比较。对从地面到 100 km 范围的整层大气, 大气透过率的误差不超过 0.0004; 对 70 km 以下的大气, 大气冷却率的误差不超过 0.004 K/d, 而计算时间却节省 1~2 个数量级左右。

关键词: 大气吸收; 逐线积分; 线翼截断

1 引言

计算大气分子吸收的逐线积分方法 (LBL) 已广泛地用于模拟气体辐射传输问题^[1]、大气遥感、大气探测以及生态监测等各个领域。由于带模式方法无法用于同时存在吸收和散射即散射大气的辐射传输问题, 进入 90 年代, k 分布方法^[2]逐渐取代带模式而广泛用于中尺度数值模拟和气候模拟中, 逐线积分方法作为计算 k 分布和相关 k 分布函数的基础以及作为检验 k 分布方法和相关 k 分布方法的参考标准, 直接和间接地用在气候和其他气象领域的研究中。即使带模式方法目前也是先用 LBL 方法得到精确的透过率, 然后通过某种“最佳”拟合求得带参数^[3]。

为了用较高的光谱分辨率模拟通过大气的辐射传输, 以逐线积分为基础来评价热发射和辐射吸收的贡献是十分必要的。大气辐射计算的核心问题实际上是大气透过率的计算, 而在大气透过率的计算中最耗时的莫过于吸收系数的计算。

虽然目前可用的计算机已达到很高的计算速度, 使得用逐线积分方法计算某一吸收气体很宽波段的吸收系数成为可能, 但仍然是相当费时的, 尤其在红外波段。这是因为, 第一, 在此波段, 几十万条振动和转动跃迁谱线都对吸收有贡献; 第二, 每一跃迁都定义一条谱线, 该谱线在很宽的频率范围内都对吸收有贡献; 第三, 吸收系数取样点的选取必须以能分辨最小的谱线半宽度为准则。例如, 在平流层中, Doppler 加宽起主要作用, 其半宽度的典型量级为 0.001 cm^{-1} , 要在某一具体的频率空间分辨这些谱线, 须要每个 cm^{-1} (波数) 频率取样点的个数超过 1 000 个点; 另一方面, 碰撞加宽使得对流层中的典型半宽度小于 0.1 cm^{-1} , 并产生跨越几十个 cm^{-1} 的翼部。因此, 在 50 cm^{-1}

范围内进行逐线计算就需要 50 000 个取样点, 而且这种计算要对成千上万条谱线重复进行(例如, 在 HITRAN'96 版本中, 已收录有 999 363 条谱线), 这使得逐线积分方法计算成本非常高, 很难应用于非均匀大气的辐射传输问题以及气候模拟等研究中。

迄今为止, 已经提出了各种逐线积分的简化计算方法^[4~8], 以减小这种计算负担。这些算法的主要不同之处在于对所用吸收线型的不同近似及不同的计算优化方法。最普遍的方法是使用多种频率(波数)步长。例如, 用细网格来模拟线中心的线型, 粗网格则用来模拟翼部。此外, 在离线中心足够远的地方, 通常忽略翼部的贡献; 若一条谱线的强度太弱, 在计算中就可以不考虑该谱线。

这些为减少计算成本而进行的各种近似处理就成为误差的来源。例如, 从粗网格向细网格的内插将误差引入到计算的吸收系数中去, 这种误差的大小依赖于内插样点的间隔; 忽略的谱线或它们的远翼是产生误差的第二来源, 将这些忽略的小项相加, 就会对吸收系数产生不可忽略的影响。

2 基本公式与计算方法

逐线积分就是逐条计入大气气体吸收谱线贡献的一种精确的透过率计算方法。假定谱线为 Lorentz 线型, 对频率间隔 $\Delta\nu$ 内的平均透过率函数 $\bar{T}(u)$, 按照下式严格进行的波数积分称为逐线积分:

$$\begin{aligned}\bar{T}(u) &= \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} T_\nu(u) d\nu = \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp(-k_\nu u) d\nu \\ &= \frac{1}{\Delta\nu} \int_{\Delta\nu} \exp\left\{-\sum_l \frac{a_{L,l} S_l u}{\pi[(\nu - \nu_{0l})^2 + a_{L,l}^2]}\right\} d\nu,\end{aligned}\quad (1)$$

其中, u 是吸收物质量, S_l 为第 l 条线的线强, $a_{L,l}$ 是 Lorentz 加宽的半宽度, 而 ν_0 为谱线中心的波数。目前已经提出的许多逐线积分的方案, 多半是为平均透过率的计算而设计的。一般说来, 这些算法相当费时。本文介绍的就是这样一种快速逐线积分方案。

2.1 基本公式

对于大气气体吸收的计算, 有四个因子是至关重要的, 即谱线的位置、强度、半宽度和线型。大气中实际存在的谱线总有一定的宽度和形状, 谱线吸收随频率而变, 在中心频率 ν_0 处吸收最大, 在两侧则迅速减小。为了表示这种吸收随频率的分布, 一般定义一个谱线的形状因子函数 $f(\nu - \nu_0)$, 于是吸收系数可写为

$$k_\nu = S f(\nu - \nu_0), \quad (2)$$

其中, k_ν 是谱线在频率 ν 处的吸收系数, S 是谱线强度, 且

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} k_\nu d\nu, \quad (3)$$

S 是温度的函数, 由量子力学的理论可以导出:

$$S = S(T_s) \frac{Q_\nu(T_s) Q_r(T_s)}{Q_\nu(T) Q_r(T)} \exp\left[\frac{1.439E''(T - T_s)}{TT_s}\right], \quad (4)$$

其中, $S(T_s)$ 是标准温度时的谱线强度, E'' 是跃迁的低态能量, Q_v , Q_r 分别是振动和转动配分函数, 均是温度的函数。振动配分函数 Q_v 的温度依赖关系不是很大, 在 175 ~ 325 K 的温度范围内, 大气主要吸收气体的 $Q_v(T)$ 可用下式表示[CO 的 $Q_v(T)$ 与温度无关, 等于 1], 其中 T 以 K 为单位:

对 H_2O 和 O_2

$$Q_v(T) = 1.00486 - 4.41322 \times 10^{-5}T + 9.73170 \times 10^{-8}T^2, \quad (5a)$$

对 CO_2

$$Q_v(T) = 1.05385 - 8.11142 \times 10^{-4}T + 3.18772 \times 10^{-6}T^2, \quad (5b)$$

对 O_3

$$Q_v(T) = 1.06712 - 7.74561 \times 10^{-4}T + 2.36961 \times 10^{-6}T^2, \quad (5c)$$

对 N_2O

$$Q_v(T) = 1.05746 - 9.09125 \times 10^{-4}T + 3.86439 \times 10^{-6}T^2, \quad (5d)$$

对 CH_4

$$Q_v(T) = 1.00486 - 4.41322 \times 10^{-5}T + 9.73170 \times 10^{-8}T^2. \quad (5e)$$

与 McClatchey 等人^[9]的表列值相比, 上述公式的最大误差的绝对值不超过 0.05%; 而转动配分函数:

$$Q_r(T) = Q_r(T_s) \left(\frac{T}{T_s} \right)^j, \quad (6)$$

式中的指数 j 随分子而异。一般, 对线形分子 (如 CO_2 , N_2O , CO , O_2 等) $j=1.0$; 而对非线性形分子 (如 H_2O , O_3 , CH_4 等) $j=1.5$ 。

由于造成谱线加宽的物理机制不同, 因而谱线的线型函数具有不同的表达形式。在实际大气的吸收计算中, 需要考虑压力加宽、Doppler 加宽和它们的混合效应 Voigt 加宽所带来的影响。在不同谱线加宽机制下, 吸收系数 k_v 的表达式如下:

$$k_v = \frac{S a_L}{\pi [(v - v_0)^2 + a_L^2]}, \quad (7a)$$

$$k_v = \frac{S}{a_D \sqrt{\pi}} \exp \left[- \left(\frac{v - v_0}{a_D} \right)^2 \right], \quad (7b)$$

及

$$k_v = \frac{k_0 Y}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-t^2)}{Y^2 + (x - t)^2} dt. \quad (7c)$$

其中, $k_0 = S / (a_D \sqrt{\pi})$, $x = (v - v_0) / a_D$, $Y = a_L / a_D$, a_L 和 a_D 分别为 Lorentz 半宽度和 Doppler 半宽度。 a_D 只是谱线中心频率 v_0 和温度的函数, 与压力无关:

$$a_D = 4.301 \times 10^{-7} v_0 \sqrt{T / M}, \quad (8)$$

其中, M 是分子量, Lorentz 半宽度的温压关系可用下式表示为

$$a_L(P, T) = a_L(P_0, T_0)(P/P_0)(T/T_0)^{-n},$$

其中, 下标 0 表示标准状态, n 是一个指数, 可从谱线资料汇编中得到。当无资料可用时, 则取其等于 0.5。

2.2 积分步长和取样点的选取

从理论上说, 频率积分的步长必须小于谱线加宽的最小宽度。在大气高层, 谱线加宽受 Doppler 效应控制, 由公式 (8), 在红外区域, Doppler 加宽的典型半宽度为 10^{-4} cm^{-1} 数量级, 如果我们要计算跨越几千 cm^{-1} 的吸收带的冷却率, 则积分取样点可能高达 10^7 个。为了提高计算效率, 本文采用文献[2]的积分步长和取样点的选取方案。以 CO_2 $15 \mu\text{m}$ 带 $665 \sim 675 \text{ cm}^{-1}$ 为例, 在比较了积分步长分别为 4、2、1、 $1/2$ 、 $1/4$ 倍的 Doppler 半宽度的冷却率结果和计算时间的基础上, 选取积分步长等于 Doppler 半宽度。在大气低层, Lorentz 加宽占优势, 其半宽度远大于 Doppler 半宽度, 故积分取样点的数目可以大大减少。

令 $Y = a_L / a_D$, 当 $Y \gg 1$ 时, 压力加宽占优势, 取积分步长 $\delta\nu = a_L$; 反之, Doppler 加宽占优势, 取 $\delta\nu = a_D$ 。波数取样点的数目为 $N = \Delta\nu / \delta\nu$ 。对 CO_2 $15 \mu\text{m}$ 带 $500 \sim 800 \text{ cm}^{-1}$ 波数区间, 当压力 $P < 100 \text{ hPa}$, $N = 546\,001$; 当压力 $P \geq 100 \text{ hPa}$, N 随压力而变, 并用三次样条函数将吸收系数内插到 546 001 个取样点上, 以便于大气冷却率的计算。

2.3 半宽度、谱线位置和线强的近似处理

在保持一定计算精度的前提下, 为了进一步提高计算速度, 对半宽度、谱线位置和线强取以下三个近似, 即

- (1) 对所有谱线使用线强加权平均的半宽度 $\bar{a}_L$;
- (2) 将线中心不恰在积分取样点上的谱线移动到积分取样点上;
- (3) 将在同一积分点上的所有谱线的强度先行求和, 然后作为一条具有和线强的单线处理, 详见文献[2]。

2.4 线翼贡献的截断

由公式 (3) 可以看出, 在吸收系数 k_ν 的计算中, 对频率的积分限应当取作无穷大。换句话说, 在计算某一点上的 k_ν 时, 应当考虑无穷远处的谱线的贡献。但是, 由于谱线强度和谱线的远翼行为都存在着某种误差和不确定性, 因此无限制地计及谱线远翼的贡献是没有实际意义的。可以根据所考虑的光谱区间中的最小线强以及精度要求, 在离开线中心的某一波数处将线翼贡献截断。目前, 已经提出了几种线翼贡献的截断方案^[10,11], 设 ν_c 为截断波数, 并令

$$\nu_c = \beta a_L, \quad (9)$$

其中 β 是某一整数; 或者, 可以事前设定一条谱线线强的 γ 部分被截断, 即

$$\gamma = 2 \int_{\nu_c + \nu_0}^{\infty} \frac{k_\nu}{S} d\nu, \quad (10)$$

文献[10]和[11]分别取 $\beta = 127$ 和 $\beta = 300$, 这就意味着谱线线强的 0.5% 和 0.2% 被忽略不计。

为了部分地补偿截断所带来的误差, 可将线强重新校正为^[11]

$$S' = S / \left(1 - \frac{2}{\beta\pi} \right),$$

本文也采用这种校正方案。

Lacis 和 Oinas^[3]以及其他作者, 使用另一种线翼贡献的截断方式, 即对每条谱线都选择从其中心开始的 5 cm^{-1} 的宽度作为对一条谱线的截断波数。这种做法使用起来相当简单。但是, 对于大气低层的强吸收线来说, 这可能过低估计线翼吸收的贡献; 而对弱线, 或者在大气高层, 这种做法却又不必要地浪费计算时间。

对线翼贡献的截断也可采用绝对截断吸收系数的方式, 并可有两种处理方法。第一种, 假定 $\Delta\nu$ 区间内谱线的最小强度为 $S_{\min}$, 并取(9)式中的 β 等于某一事前指定的数值 $\beta_{\min}$ 。若取 $\beta_{\min} = 100$ 的话, 则最小线强的 0.6% 将被截断。如果第 l 条谱线的强度为 S_l , 为了保持相同大小的吸收系数不被忽略, 则应取

$$\beta_l = \beta_{\min} \sqrt{S_l / S_{\min}}. \quad (11)$$

第二种, 假定 $\Delta\nu$ 区间内谱线的最大强度为 $S_{\max}$, 并取(9)式中的 β 等于某一事前指定的数值 $\beta_{\max}$ 。例如, 若取 $\beta_{\max} = 2000$, 则最大线强的 0.03% 将被截断。若第 l 条谱线的强度为 S_l , 则取

$$\beta_l = \beta_{\max} \sqrt{S_{\max} / S_l}. \quad (12)$$

对线强的重新校正只对低层大气施行。对高层大气, 由于谱线比较尖锐, 所取的截断足以满足精度要求。不同线翼贡献截断处理方法带来的影响, 将在下节给出。另外, 在实际计算中, 对 $\Delta\nu$ 区间以外的谱线的线翼贡献亦应进行类似处理。为简单计, 本文取其恒等于 5 cm^{-1} 。

3 结果比较

本文选取地球大气中重要的红外吸收气体的吸收带之一来例证本文提出的方法的精度和效率, 即 CO_2 $15 \mu\text{m}$ 带的 $500 \sim 800 \text{ cm}^{-1}$ 波段, 它包括了这条带的最重要的部分, 共有 18 448 条谱线。本节将描述利用上述简化方法计算的大气 CO_2 $15 \mu\text{m}$ 带的吸收系数、透过率和冷却率与经典的逐线积分方法的比较。

3.1 谱线资料、大气廓线的选取

本文所用的谱线资料是 Rothman 等人在 Internet 网上公布的分子资料汇编的最新版 HITRAN '96。其中, 气体的种类为 37 种, 覆盖了 $0 \sim 22\,656 \text{ cm}^{-1}$ 波段的 999 363 条谱线。

温度、压力廓线使用 GFDL 逐线积分结果中所用数据, 基本上由中纬度夏季模式大气 (LMS)^[12]内插而得。大气按压力分层, 在 $1\,000.0 \text{ hPa} \sim 100.0 \text{ hPa}$ 之间, 每 20 hPa 一层, 等压力间隔地划分为 45 层; 在 $10^2 \sim 10^3 \text{ hPa}$ 之间, 按 $\Delta p = \exp(\ln 10 / 15)$

等压力对数间隔地划分为 76 层; 地面气压取为 1 013.0 hPa, 大气顶取在 3.0×10^{-4} hPa, 共 123 层。这种模式大气的分层选取, 只是为了比较吸收系数的简化计算方案与“经典的”逐线积分结果相比可能达到的精度, 以及计算时间的节省。实际大气中, 由于在大约 70 km 以上, 就必须考虑非局地热力学平衡的影响, 所以这里给出的冷却率结果是没有实际意义的。在本文的计算中, 取 CO_2 体积分数为 358×10^{-6} , 即其 1994 年的大气浓度^[13]。

3.2 I 取值的影响

本文选取固定 5 cm^{-1} 的线翼贡献截断方式, 并按 (1) 式的严格波数积分作为比较标准, 称之为“经典的”逐线积分。其中, 对整层大气都采用 Voigt 廓线, 在本文的程序设计中可有两种计算 Voigt 廓线的方法^[14,15]。文献[14]计算速度快, 效率高, 文献[15]计算的精度高, 但速度稍慢。由于本文的重点在于讨论 § 2.2~ § 2.4 的各种处理方法的有效性, 故选择了前者。在简化方案中, 为了在精度和计算时间之间取得某种折衷, 对谱线中心两边的 I 个取样点的吸收系数用 Voigt 线型进行计算; 对大于 I 的取样点 (即谱线的翼部) 的吸收系数则用如下简化的 Lorentz 线型计算^[2]。

$$k_v = \frac{S}{a_D \sqrt{\pi}} \exp(-U^2), \quad (13)$$

其中, $U = n/M, n > I$ 。

为了考察 I 取值对结果的影响, 我们用简化的 Lorentz 线型(13)和 Voigt 两种线型计算了不同压力和不同 I 取值下的吸收系数, 并对它们进行了误差分析, 如图 1 所示。其中, 横坐标为大气压力, 纵坐标为 I 的取值, 等值线为(13)式带来的误差。由图可以看出: 对 10 hPa 高度 (大约 30 km) 以下的大气, 若取 $I=200$, 用简化 Lorentz 线型计算的吸收系数与用 Voigt 线型计算的吸收系数相比, 误差小于 0.3%。这也从另一个角度说明, 在低层大气, 完全可以用 Lorentz 线型进行吸收系数的计算。而对 30 km 以上的大气, 若希望用简化 Lorentz 线型计算的吸收系数的误差小于 1% 的话, 则 I 的取值须大致与压力成反比, 即 $I=1/P$ (这里, P 以大气压 atm 为单位, $1 \text{ atm}=1\,013.25$

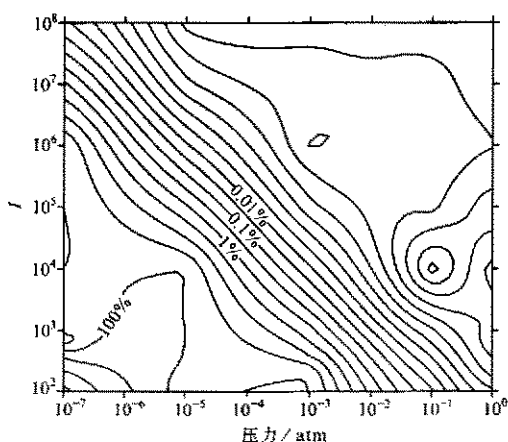


图 1 不同压力下, I 取值对吸收系数误差的影响

hPa)。为此, 本文设计了两种计算方案来决定如何选取 I 。方案一, 对 30 km 以下的大气, 取 $I=200$; 对 30 km 以上的大气, 取 $I=1/P$; 方案二, 对整层大气, 在所有压力和温度下, 取 $I=200$, 其值不变。显然, 这种做法将使计算的高层大气的线翼吸收系数产生严重误差, 误差可高达几个数量级。但是, 由于在大气高层, Doppler 加宽占统治地位, 如果 (13) 式中的 U (即这里的 I) ≥ 200 的话, 吸收系数已减少到线中心的 e^{-4000} 倍, 所以即使有几个数量级的误差, 也不会对大气透过率和冷却率带来任何实际的

影响。数值计算表明, 对 CO_2 带中心 $660\sim 670\text{ cm}^{-1}$ 波段的冷却率而言, 第二种方法带来的相对误差在千分之几到万分之几范围内, 而所用的计算时间却可节省近一个数量级。故在本文的计算中, 选取第二种方法给出 I 值。

3.3 不同线翼贡献截断方式的影响

本文用以下四种方案试验了不同线翼截断方式对不同压力下吸收系数的影响: (1) $v_c = 5\text{ cm}^{-1}$; (2) 公式(13), 其中 β 分别取 100、300 和 1000; (3) 公式(11), 其中 $\beta_{\min}$ 分别取 1、5、10 和 50; (4) 公式(12), 其中 $\beta_{\max}$ 分别取 1000、10 000 和 30 000, 有关结果见表 1。计算中, 温度取标准温度 296 K, 此时 CO_2 $15\text{ }\mu\text{m}$ 带 $500\sim 800\text{ cm}^{-1}$ 区间的谱线强度之和为 $9.158\,984\times 10^{-18}\text{ (cm}^2\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{cm}^{-1}\text{)}$, 压力取 1.0、0.01 和 0.0001 个大气压, 基本上涵盖了大气辐射计算中经常遇到的压力范围。表 1 中的 $\sum k\delta v$

表 1 不同截断方法对吸收系数和计算时间的影响

截断方法	β	$\beta_{\min}$	$\beta_{\max}$	截断波数 / cm^{-1}	计算时间 / s	$P /$ hPa	$\sum k\delta v /$ $(\text{cm}^2 / \text{mol} \cdot \text{cm}^{-1} \cdot 10^{-18})$
1				5	16447.4	1.0	9.150942
2	100				169.2	1.0	9.142894
2	300				225.2	1.0	9.142894
2	1000				373.0	1.0	9.142894
3		1			167.0	1.0	9.142905
3		5			202.1	1.0	9.142897
3		10			253.8	1.0	9.142895
3		50			498.8	1.0	9.142894
4			1000		179.1	1.0	9.142917
4			10000		224.6	1.0	9.143767
4			30000		556.9	1.0	9.142901
1				5	10362.8	1.0×10^{-2}	9.151537
2	100				129.1	1.0×10^{-2}	9.153961
2	300				184.6	1.0×10^{-2}	9.153204
2	1000				332.9	1.0×10^{-2}	9.152051
3		1			140.6	1.0×10^{-2}	9.151650
3		5			168.0	1.0×10^{-2}	9.151533
3		10			217.5	1.0×10^{-2}	9.151526
3		50			458.7	1.0×10^{-2}	9.151528
4			1000		143.9	1.0×10^{-2}	9.151592
4			10000		193.3	1.0×10^{-2}	9.151758
4			30000		533.9	1.0×10^{-2}	9.157880
1				5	4936.7	1.0×10^{-4}	9.156793
2	100				56.6	1.0×10^{-4}	9.157165
2	300				86.8	1.0×10^{-4}	9.156933
2	1000				168.1	1.0×10^{-4}	9.156843
3		1			73.1	1.0×10^{-4}	9.156803
3		5			85.1	1.0×10^{-4}	9.156793
3		10			111.0	1.0×10^{-4}	9.156793
3		50			246.6	1.0×10^{-4}	9.156793
4			1000		68.7	1.0×10^{-4}	9.156800
4			10000		104.3	1.0×10^{-4}	9.156814
4			30000		284.5	1.0×10^{-4}	9.157043

为吸收系数之和。理论上,它应当尽可能接近区间内的谱线线强之和[见公式(3)]。但实际上,由于区间内(特别是如果两个端点附近存在强线的话)谱线线翼向区间外的延伸,以及区间外谱线线翼向区间内的扩展,所以两者不可能完全相等。它们之间的差值,大致反映着线翼截断的影响。这里的计算是在 Pentium II-266 PC 上进行的。读者可以综合计算时间和吸收系数之和与线强之差这两个方面,得出不同压力下的最优截断方案。本文取方案(4)中的 $\beta=30\,000$ 。这样可以在保持吸收系数大致同等精度的前提下,成倍地节约计算时间,尤其是在大气高层。

在吸收系数的计算中,吸收系数的上述逐线积分方案,较之根据(1)和(7)式的直接积分,可以使计算速度提高1~2个数量级。

3.4 透过率和冷却率

表2给出了计算中所用的大气压力和温度廓线以及用“经典的”逐线方法和本文提出的简化方法计算的整层大气的透过率、冷却率结果和它们之间的差异。其中,CR1和TR1是用“经典的”LBL方法计算的大气冷却率和透过率,CR2和TR2是用简化方法计算的大气冷却率和透过率, ΔCR 表示用这两种方法计算的冷却率的绝对差值, ΔTR 表示用这两种方法计算的透过率的绝对差值。由表2可以看出,在70 km以下,简化方法与“经典的”LBL方法所得到的CO₂ 15 μm 带的冷却率之间的最大不同,在绝大多数高度上均小于0.004 K/d,特别是在50 km附近的最大冷却率处,两者相差不超过0.001 26 K/d,而计算时间却节省了近一个半数量级(38 572 s/1 004 s, Pentium II-300 PC)。整层大气的透过率,绝对误差均小于0.000 4。

表 2 大气透过率和冷却率结果的比较

<i>N</i>	<i>Z</i> / km	<i>P</i> / hPa	<i>T</i> / K	CR1 / K / d	CR2 / K / d	ΔCR / K / d	TR1	TR2	ΔTR
2	95.07	1.00×10^{-3}	210.72	-38.41786	-38.41636	0.0015	1.00000	1.00000	0
3	94.13	1.17×10^{-3}	210.97	-33.2086	-33.15548	0.05312	1.00000	1.00000	0
5	92.23	1.58×10^{-3}	211.45	-25.21393	-25.17703	0.0369	1.00000	1.00000	0
7	90.33	2.15×10^{-3}	211.94	-19.69326	-19.66521	0.02805	1.00000	1.00000	0
9	88.42	2.93×10^{-3}	212.43	-15.01455	-14.99318	0.02137	1.00000	1.00000	0
11	86.51	3.98×10^{-3}	212.92	-11.89903	-11.88184	0.01719	1.00000	1.00000	0
13	84.59	5.41×10^{-3}	213.42	-9.28128	-9.26723	0.01405	1.00000	1.00000	0
15	82.67	7.36×10^{-3}	213.91	-7.46603	-7.45456	0.01147	1.00000	1.00000	0
17	80.75	1.00×10^{-2}	214.4	-6.15534	-6.14588	0.00946	1.00000	1.00000	0
19	78.82	1.36×10^{-2}	214.9	-4.97541	-4.96747	0.00794	1.00000	1.00000	0
21	76.89	1.85×10^{-2}	215.39	-3.91563	-3.90894	0.00669	1.00000	1.00000	0
23	74.95	2.51×10^{-2}	215.89	-2.97861	-2.97295	0.00566	1.00000	1.00000	0
26	72.04	3.98×10^{-2}	216.64	-1.68737	-1.68303	0.00434	1.00000	1.00000	0
28	70.09	5.41×10^{-2}	217.36	-0.96816	-0.96449	0.00367	1.00000	1.00000	0
30	68.12	7.36×10^{-2}	220.9	-1.18736	-1.18385	0.00351	1.00000	1.00000	0
32	66.11	1.00×10^{-1}	226.93	-2.01216	-2.00851	0.00365	1.00000	1.00000	0
34	64.04	1.36×10^{-1}	233.26	-2.69018	-2.68636	0.00382	1.00000	1.00000	-2×10^{-5}
35	62.99	1.58×10^{-1}	236.49	-3.05164	-3.04779	0.00385	0.99992	0.9997	-2×10^{-4}
37	60.83	2.15×10^{-1}	243.08	-3.75901	-3.75512	0.00389	0.99936	0.9992	-2×10^{-4}
39	58.62	2.93×10^{-1}	249.85	-4.5246	-4.52075	0.00385	0.99866	0.9985	-2×10^{-4}
41	56.34	3.98×10^{-1}	256.8	-5.47583	-5.47219	0.00364	0.99774	0.9976	-2×10^{-4}
43	54	5.41×10^{-1}	263.93	-6.62948	-6.62646	0.00302	0.99655	0.9963	-2×10^{-4}
44	52.81	6.31×10^{-1}	267.54	-7.3363	-7.33372	0.00258	0.99583	0.9956	-2×10^{-4}

(续表 2)

N	$Z /$ km	$P /$ hPa	$T /$ K	$CR1 /$ K/d	$CR2 /$ K/d	$\Delta CR /$ K/d	TR1	TR2	ΔTR
46	50.37	8.58×10^{-1}	274.66	-8.86626	-8.865	0.00126	0.99405	0.9938	-2×10^{-4}
48	47.9	1.17	275.49	-8.36192	-8.36218	-0.00026	0.9917	0.9915	-2×10^{-4}
49	46.66	1.36	273.7	-7.58856	-7.58934	-0.00078	0.99032	0.9901	-3×10^{-4}
51	44.23	1.85	268.5	-6.13002	-6.13111	-0.00109	0.98713	0.9869	-3×10^{-4}
54	40.67	2.93	259.66	-4.47757	-4.47769	-0.00012	0.98085	0.9805	-3×10^{-4}
56	38.36	3.98	253.83	-3.68979	-3.68879	0.001	0.97531	0.975	-3×10^{-4}
58	36.1	5.41	248.19	-3.06472	-3.06244	0.00228	0.96834	0.968	-4×10^{-4}
59	34.99	6.31	245.59	-2.82103	-2.81824	0.00279	0.96413	0.9638	-3×10^{-4}
61	32.81	8.58	240.71	-2.39643	-2.39336	0.00307	0.9542	0.9539	-3×10^{-4}
63	30.67	1.17×10	235.95	-1.99364	-1.99093	0.00271	0.94145	0.9412	-2×10^{-4}
64	29.61	1.36×10	233.61	-1.79523	-1.79275	0.00248	0.93398	0.9337	-3×10^{-4}
65	28.57	1.58×10	231.29	-1.59834	-1.5962	0.00214	0.92554	0.9253	-3×10^{-4}
66	27.54	1.85×10	229.01	-1.40591	-1.40406	0.00185	0.91612	0.9159	-2×10^{-4}
67	26.51	2.15×10	226.85	-1.23387	-1.23229	0.00158	0.90579	0.9056	-2×10^{-4}
68	25.5	2.51×10	225.06	-1.0949	-1.09357	0.00133	0.8944	0.8942	-2×10^{-4}
69	24.49	2.93×10	223.68	-0.97534	-0.97425	0.00109	0.882	0.8818	-2×10^{-4}
70	23.49	3.41×10	222.44	-0.8671	-0.86628	0.00082	0.86863	0.8685	-2×10^{-4}
71	22.49	3.98×10	221.24	-0.75633	-0.75588	0.00045	0.8543	0.8542	-1×10^{-4}
72	21.5	4.64×10	220.04	-0.643	-0.6427	0.0003	0.83902	0.8389	-1×10^{-4}
73	20.51	5.41×10	218.85	-0.5284	-0.52814	0.00026	0.82297	0.8228	-1×10^{-4}
74	19.53	6.31×10	217.66	-0.41369	-0.4135	0.00019	0.80634	0.8062	-1×10^{-4}
75	18.56	7.36×10	216.51	-0.31225	-0.31209	0.00016	0.78936	0.7893	-1×10^{-4}
76	17.59	8.58×10	215.81	-0.23852	-0.23838	0.00014	0.77229	0.7722	-1×10^{-4}
77	16.62	1.00×10^2	215.75	-0.17319	-0.17306	0.00013	0.75513	0.755	-1×10^{-4}
78	15.47	1.20×10^2	215.75	-0.10979	-0.10968	0.00011	0.73501	0.7349	-8×10^{-5}
79	14.49	1.40×10^2	215.75	-0.03833	-0.03825	8×10^{-5}	0.71797	0.7179	-7×10^{-5}
80	13.65	1.60×10^2	215.86	0.02424	0.02428	4×10^{-5}	0.7033	0.7032	-7×10^{-5}
82	12.23	2.00×10^2	220.69	-0.00167	-0.00164	3×10^{-5}	0.67857	0.6785	-7×10^{-5}
84	11.03	2.40×10^2	228.43	-0.08922	-0.08919	3×10^{-5}	0.65629	0.6562	-6×10^{-5}
86	9.98	2.80×10^2	235.25	-0.13505	-0.13501	4×10^{-5}	0.63524	0.6352	-6×10^{-5}
88	9.05	3.20×10^2	241.32	-0.16452	-0.16448	4×10^{-5}	0.61546	0.6154	-5×10^{-5}
90	8.21	3.60×10^2	246.79	-0.18622	-0.1862	2×10^{-5}	0.59688	0.5968	-5×10^{-5}
93	7.08	4.20×10^2	254.1	-0.21097	-0.21092	5×10^{-5}	0.57144	0.5714	-4×10^{-5}
96	6.08	4.80×10^2	260.41	-0.22353	-0.2235	3×10^{-5}	0.54821	0.5482	-5×10^{-5}
99	5.17	5.40×10^2	265.94	-0.22976	-0.22973	3×10^{-5}	0.52718	0.5271	-4×10^{-5}
103	4.08	6.20×10^2	272.5	-0.23827	-0.23823	4×10^{-5}	0.5022	0.5022	-3×10^{-5}
107	3.1	7.00×10^2	278.37	-0.25079	-0.25073	6×10^{-5}	0.48015	0.4801	-3×10^{-5}
112	2	8.00×10^2	284.92	-0.27814	-0.27811	3×10^{-5}	0.45591	0.4559	-2×10^{-5}
117	1.01	9.00×10^2	289.89	-0.2841	-0.28409	1×10^{-5}	0.43496	0.4349	-3×10^{-5}
122	0.11	1.00×10^3	293.56	-0.30635	-0.30648	-0.00013	0.4169	0.4169	-2×10^{-5}
123	0	1.01×10^3	294	0	0	0	0.41473	0.4147	-1×10^{-5}

4 讨论

本文发展了一种新的计算大气气体吸收系数和冷却率的快速数值方法。以大气主要温室气体 CO_2 $15 \mu\text{m}$ 带的 $500 \sim 800 \text{ cm}^{-1}$ 波段为例, 将该方法计算的吸收系数、大气

透过率和冷却率与“经典的”逐线积分方法进行了比较。在 50 km 以下, 用此方法计算的吸收系数与“经典的”逐线积分相比, 精度可达到千分之几的数量级, 而计算时间可以减少一倍以上。在 50 km 以上, 用此方法计算的远翼吸收系数与“经典的”结果相比, 相差较大。但正如 § 3.2 所述, 由于它们的绝对值已经很小, 所以对冷却率的贡献不大, 可以不考虑这部分吸收所造成的误差。在吸收系数计算方面, 在 0~100 km 的 123 个高度上, 新方法所用的计算时间不到“经典的”方法的 $1/38$ 。对从地面到 100 km 范围的整层大气, 大气透过率的误差不超过 0.0004; 对 70 km 以下的大气, 大气冷却率的误差不超过 0.004 K/d, 而计算时间却减少近一个半数量级。

本文详细讨论了影响逐线积分精度和计算时间的各种因子, 特别是不同线翼贡献截断方案以及不同远翼线型处理方法所带来的影响, 读者可以根据需要和可能, 自行组合以得到最优选择。这里需要说明的是, 目前难于断定何种方案的结果最为精确, 因为线翼贡献的截断, 除了必须考虑精度要求以及计算时间外, 还涉及到远翼线型^[1,11,16], 最终应当靠精确的实验室测量结果判定其恰当与否。

另外, 本文还用简化方法对 CO_2 15 μm 带中心 $664.5\sim 669.5\text{ cm}^{-1}$ 波段进行了透过率和冷却率的计算, 结果表明: 本文所提出的方法, 不仅可以用于宽波段的温室气体气候效应的研究, 而且完全可以用于窄波段的大气遥感探测研究。

参 考 文 献

- 1 Goody, R. M. and Y. L. Yung, *Atmospheric Radiation*, Oxford University Press, 1989, 125~187.
- 2 石广玉, 大气辐射计算的吸收系数分布模式, *大气科学*, 1998, **22**, 659~676.
- 3 Lacis, A. A. and V. Oinas, A description of the correlated k -distribution model for modeling nongray gaseous absorption, thermal emission, and multiple scattering in vertical inhomogeneous atmospheres, *J. Geophys. Res.*, 1991, **96**, 9027~9063.
- 4 Taine J., A line-by-line calculation of low-resolution radiative properties of CO_2 -CO-transparent nonisothermal gases mixtures up to 3000 K, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1982, **30**, 371~379.
- 5 Oinas, V., Rapid transmittance integration using line blending and a straight-line fit to line shapes, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1983, **29**, 407~411.
- 6 Mitsel A. A. and Firsov K. M., A fast line-by-line method, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1995, **3**, 549~557.
- 7 Sparks, L., Efficient line-by-line calculation of absorption coefficients to high numerical accuracy, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1997, **57**, 631~650.
- 8 Turner D. S., Absorption coefficient estimation using a two-dimensional interpolation procedure, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1995, **53**, 633~637.
- 9 McClatchey, R. A. et al., AFCRL Atmospheric Absorption Line Parameters Compilation, AFCRL-TR-73-0096, 1973, 3~4.
- 10 Chou, M. D. and L. Kouvaris, Monochromatic calculations of atmospheric radiative transfer due to molecular line absorption, *J. Geophys. Res.*, 1986, **19**, 4047~4055.
- 11 Shi Guangyu, An Accurate Calculation and Representation of the Infrared Transmission Function of the Atmospheric Constituents, Ph. D. Thesis, Tohoku University of Japan, 1981, 27~49.
- 12 McClatchey, R. A. et al., Optical Properties of the Atmosphere (Third Edition), AFCRL-72-0497, 1972, 3.
- 13 WMO UNEP, *Climate Change 1995, The Science of Climate Change*, Cambridge University Press, 1996, 14~15.
- 14 Drayson, S. R., Rapid computation of the Voigt profile, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1976, **16**, 611~614.
- 15 Humlicek J., Optimized computation of the Voigt and complex probability functions, *J. Quant. Spectrosc.*

Radiat. Transfer, 1982, 27, 437~444.

- 16 Edwards, D. P. and L. L. Strow, Spectral line shape considerations for Limb temperature sounders, *J. Geophys. Res.*, 1991, 96, 20859~20868.

A Fast and Efficient Line-By-Line Calculation Method for Atmospheric Absorption

Zhang Hua and Shi Guangyu

(*Institute of Atmospheric Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100029*)

Abstract A new Line-by-Line (LBL) integration algorithm for calculating spectral absorption coefficients, atmospheric transmittance and cooling / heating rates is developed in this paper. The factors affecting the accuracy and calculating time in the LBL calculation are discussed in detail. Taking an example of CO₂ 15 μm band, comparisons are made for the transmittance differences and cooling / heating rates differences between computations by the new method and by the "exact" method. From 2 km above the surface to the altitude of 100 km, the calculation errors of the integral transmittance are not larger than 0.0004%. For the atmosphere lower than 70 km, the cooling / heating rate errors are not larger than 0.004 K / day. The calculating time by the new method, however, is only one tenth of the "exact" LBL method.

Key words: atmospheric absorption; line-by-line integration; cutoff of the line wings